Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 3 - 3 de septiembre de 2021

Problema 1: Una distribución de probabilidades $\{P_i\}$ correspondiente a M eventos está adecuadamente normalizada ($\sum_{i=1}^{M} P_i = 1$). Muestre que la función

$$S(\{P_i\}) = -\sum_i P_i \ln P_i$$

toma su máximo valor cuando $P_i = 1/M$ para todo i. Calcule el valor de $S(\{P_i\})$.

Problema 2: Suponga que una urna contiene pelotas con números, y que estos números pueden ser 0, 1 ó 2. Se sabe además que el valor medio del número inscripto en las pelotas de la urna es $\langle n \rangle = 2/7$.

a) Usando el principio de máxima incertidumbre, estime las probabilidades P_0, P_1 y P_2.

b) Suponga ahora que además se sabe que $\langle n^3 \rangle = 3/7$. Estime las probabilidades P_0, P_1 y P_2. Muestre que el nuevo valor de S es menor que el obtenido en el inciso anterior (con ayuda de calculadora al menos).

Problema 3: Determine la densidad de probabilidad $f_X(x)$ que maximiza la entropía estadística para una variable estocástica continua X (en todo el rango real), imponiendo $\langle x^2 \rangle = m_2$ además de la condición de normalización para f_X.

Problema 4: Utilizando la definición (clásica)

$$S = -k_B \int d\mathbf{X}^N \rho\left(\mathbf{X}^N\right) \ln\left[C^N \rho\left(\mathbf{X}^N\right)\right]$$

para la entropía en función de la densidad de probabilidad en el microcanónico, determine mediante un cálculo variacional (usando la condición de normalización) la forma correspondiente para ρ y para S.

Problema 5: Muestre que las siguientes expresiones para la entropía son equivalentes:

$$S = k_B \ln \frac{\Sigma(E)}{\tilde{C}^N}\,, \qquad S = k_B \ln \frac{\Omega(E)}{C^N}\,, \qquad S = k_B \ln \frac{\omega(E)}{C^N}\,,$$

donde $\Sigma(E)$ es la superficie de energía E en el espacio de las fases, $\Omega(E)$ es el volumen encerrado por $\Sigma(E)$, y $\omega(E)$ es el volumen entre $\Sigma(E)$ y $\Sigma(E+\Delta E)$. ¿Cómo debe ser la constante $\tilde{C}^N$?

Problema 6: Un gas ideal clásico que consiste de N masas puntuales *distinguibles* está contenido en una caja de volumen V. Encuentre el número de estados $\Omega(E)$ con energía menor que E, y a partir de allí derive las ecuaciones de estado $T(U,V,N)$ y $P(T,V,N)$. Determine además una expresión para la entropía de este gas y analice su extensividad.

Problema 7: Verifique la extensividad de la entropía agregando el contaje correcto de Boltzmann al analizar el gas ideal del problema anterior.

Problema 8: En un gas ideal de N partículas ultra-relativistas de masa m contenidas en una caja cúbica de lado L $(V = L^3)$ la energía cinética de cada partícula es mucho mayor que su energía en reposo mc^2, donde c es la velocidad de la luz. El espectro de energías individuales puede aproximarse entonces como

$$\epsilon = \sqrt{(c\,\boldsymbol{p})^2 + m^2c^4} \simeq c\,|\boldsymbol{p}|\ .$$

a) Encuentre una expresión general para el volumen del espacio de fases para este sistema correspondiente a microestados con energía total menor o igual a E, y demuestre que la entropía $S(E,V,N)$ depende de E y V de la forma $S(E,V,N) = S(E\,V^{1/3},N)$.

b) Muestre que para este gas el cociente de calores específicos resulta $c_P/c_V = 4/3$ (en lugar del valor $5/3$ para el caso no relativista).

Problema 9: *Sistema de dos niveles.* Considere un sistema de N núcleos conformando un sólido en el cual la energía de cada partícula puede tomar el valor 0 ó $\epsilon > 0$, de modo que la energía total del sistema es U.

a) Encuentre la entropía del sistema como función de U, derive su temperatura y el calor específico.

b) Muestre que la temperatura puede ser negativa. Discuta.

c) ¿Qué sucede cuando un sistema de temperatura negativa puede intercambiar calor con uno de temperatura positiva?

d) Repita los incisos anteriores cuando las energías individuales permitidas son $-\epsilon$ y ϵ.

Considere ahora un sistema de N espines 1 localizados gobernado por el hamiltoniano

$$\mathcal{H} = D \sum_{i=1}^{N} s_i^2 \ ,$$

donde cada una de las variables s_i puede asumir los valores $-1, 0, +1$.

e) ¿En qué cambia el problema planteado en los incisos anteriores? Repita el ítem **a)** para este sistema.

Problema 10: Considere un sistema compuesto por N osciladores no interactuantes clásicos y *distinguibles* de masa m y frecuencia ω. Calcule la entropía cuando el sistema tiene energía total E; calcule también el calor específico.

Problema 11: *Modelo de sólido de Einstein.* Considere un sistema de N osciladores cuánticos distinguibles no interactuantes, cuyo espectro de energía está dado por

$$\epsilon(n) = (n + 1/2)\hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Obtenga una expresión asintótica para la entropía. Determine la temperatura T en función de E/N y $\hbar\omega$. Calcule el calor específico a N constante, analice los límites de bajas y altas temperaturas y muestre que en este último caso se recupera la ley de Dulong y Petit.

Compare los resultados con los obtenidos en el ejercicio anterior.